

ABSTRAK

Simulasi kuantum reaksi pembentukan COOH pada permukaan PtMo(111) dengan metode *density functional theory* telah dilakukan. Penelitian telah berhasil menentukan situs-situs paling disukai untuk koadsorpsi CO dan OH beserta adsorpsi COOH pada permukaan PtMo(111). Situs top Pt untuk CO, situs top Mo untuk OH, dan situs top Pt untuk COOH merupakan situs paling disukai. Selain itu, mekanisme adsorpsi COOH pada permukaan PtMo(111) telah diklarifikasi dengan distribusi muatan dan rapat keadaan lokal pada kulit p_z sebagai orbital yang berperan dalam pembentukan ikatan CO, OH dan COOH pada permukaan PtMo(111). Hasil simulasi menunjukkan COOH terbentuk di situs top Pt dengan $E_{\text{barrier}} = 0,63$ eV.

Kata kunci : CO, OH, COOH, PtMo(111), dan *density functional theory*



ABSTRACT

Quantum simulation of COOH formation reaction on the surface of PtMo (111) with the density functional theory method has been carried out. Research has succeeded in determining the most preferred sites for CO and OH adsorption along with COOH adsorption on PtMo surfaces (111). The Pt top site for CO, the Mo top site for OH, and the Pt top site for COOH are the most preferred sites. In addition, the mechanism of COOH adsorption on PtMo surfaces (111) has been clarified by charge distribution and local state density in pz skin as orbitals that play a role in the formation of CO, OH and COOH bonds on PtMo surfaces (111). The simulation results show COOH formed at the top Pt site with $E_{\text{barrier}} = 0.63 \text{ eV}$.

Keyword : CO, OH, COOH, PtMo(111), and *density functional theory*.

